DIFERENCIACION NUMERICA

La derivada de una función tiene muchas aplicaciones, entre las cuáles esta la determinación de la velocidad instantánea de una partícula o móvil a partir de su función de posición. Este proceso es en ocasiones algo muy sencillo cuando se cuenta con dicha función, pero cuando se requiere solucionar el mismo problema con un conjunto de datos discretos y no con su función, el procedimiento no puede ser llevado de igual manera, es decir, el calculo no nos da una solución directa, por lo tanto se debe recurrir a otro tipo de análisis.

En la unidad anterior se estudio la aproximación polinomial para un conjunto de datos tabulados con base en esos conceptos. En esta unidad se estudiara la aproximación polinomial a partir de algunos valores de una función f, y dando ciertos puntos se puede determinar su derivada en un punto dado.

La derivada de una función f en x_0, esta definido de la siguiente manera:

$$f'(x_0) = \lim_{h \to 0} \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h}$$

Para valores pequeños de h, podemos aproximar la derivada de f en x_0 de la siguiente manera:

$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h}, \quad h \neq 0 \qquad (4.1)$$

Notaremos la aproximación a la derivada de una función f como f'
Esta formula aunque sencilla no tiene un comportamiento estable, ya que para funciones lineales puede llegar a ser exacta, no siendo así para funciones más generales. Pero sin duda alguna, es un buen punto de partida para el calculo de la derivada de una función, además hay que considerar que en algunos casos es la única opción con que se cuenta.

Para estimar el valor del error asociado a la ecuación (4.1), nos valemos del polinomio e Taylor de primer grado cuya estructura es la siguiente:

$$f(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \frac{f''(\xi)}{2}(x - x_0)^2 \qquad (4.2)$$

Si se toma $x = x_0 + h$,entonces $h = x - x_0$ y se reemplaza en el polinomio (4.2), se tiene entonces que:

$$f(x_0 + h) = f(x_0) + f'(x_0)h + \frac{f''(\xi)}{2}h^2, \quad x_0 < \xi < x_0 + h$$

Despejando *f'(x0),* se obtiene

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} - Oh \qquad (4.3)$$

Donde $O = \frac{f''(\xi)}{2}$, es el error de truncamiento.

Si $h > 0$, a la formula (4.3) se le denomina la *primera diferencia finita hacia delante* o *diferencia progresiva* También podemos obtener la *diferencia finita hacia atrás* o *diferencia regresiva* si $h < 0$

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0) - f(x_0 - h)}{h} + Oh \qquad (4.4)$$

Ahora bien, si sumamos las ecuaciones (4.3) y (4.4), obtendremos la *diferencia finita centrada* de la siguiente manera:

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0 - h)}{2h} + Oh^2 \qquad (4.5)$$

Podemos observar que el error de la ecuación (4.5) es del orden h^2, a diferencia de las ecuaciones (4.3) y (4.4) que tienen un error del orden h, es decir que la ecuación (4.5) converge rápidamente a cero, pero para ello se debe contar con 3 valores de *f(x)* a diferencia de (4.3) y (4.4) que solo requiere de dos puntos de la función *f(x)*.

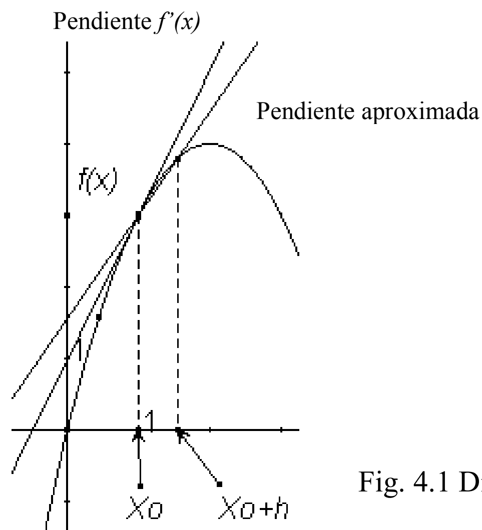


Fig. 4.1 Diferencia Finita Progresiva

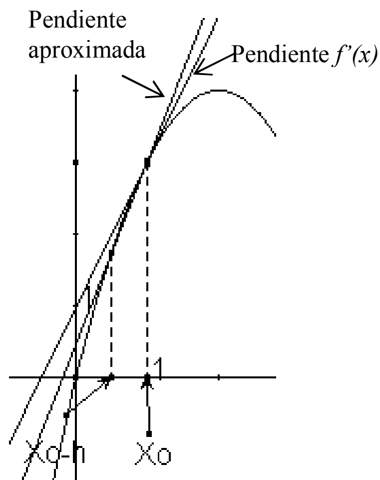


Fig. 4.2 Diferencia Finita Regresiva

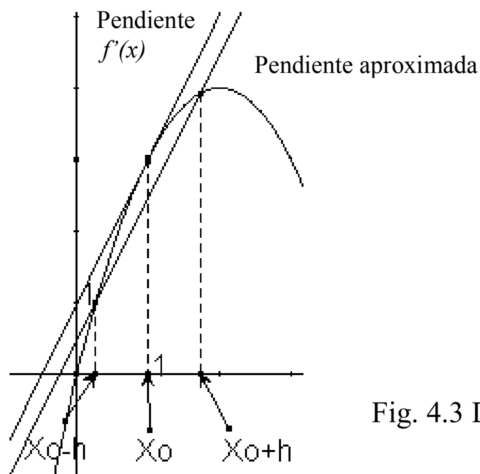


Fig. 4.3 Diferencia Finita Centrada

De manera análoga a la interpolación polinomial, el uso de mas puntos en la evaluación de la derivada producirá mayor exactitud; aunque esto implica mayor cantidad de evaluaciones funcionales y aumento de error de redondeo.

Entre las formulas mas comunes están la de tres puntos y la de cinco puntos. A continuación se mostrara la deducción de la formula de tres puntos a partir del polinomio de Taylor de segundo grado.

Se sabe que:

$$f(x) = f(x_0) + f'(x_0)h + \frac{f''(x_0)}{2}h^2 + \frac{f'''(\xi)}{6}h^3$$

Despejando $f'(x_0)$ se tiene

$$f'(x_0) = \frac{f(x) - f(x_0)}{h} - \frac{f''(x_0)}{2}h - \frac{f'''(\xi)}{6}h^2 \qquad (4.6)$$

Como se quiere determinar la formula de los tres puntos, se toma

X0,

$x_1 = x_0 + h$,

$x_2 = x_0 + 2h$

y usando la ecuación (4.6) $x = x_1$

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} - \frac{f''(x_0)}{2}h - \frac{f'''(\xi)}{6}h^2$$

Para determinar $f''(x_0)$ en términos de x0, x1 y x2, se realiza los polinomios de Taylor de segundo grado para $x_1 = x_0 + h$ y para $x_2 = x_0 + 2h$

$$f(x_0 + h) = f(x_0) + f'(x_0)h + \frac{f''(x_0)}{2}h^2 \qquad (4.7)$$

$$f(x_0 + 2h) = f(x_0) + f'(x_0)2h + \frac{f''(x_0)}{2}(2h)^2 \qquad (4.8)$$

multiplicando a (4.7) por –2 y sumándoselo a (4.8) se tiene:

$$f(x_0 + 2h) = f(x_0) + f'(x_0)2h + 2f''(x_0)h^2$$
$$-2f(x_0 + h) = -2f(x_0) - f'(x_0)2h + f''(x_0)h^2$$

$$f(x_0 + 2h) - 2f(x_0 + h) = -f(x_0) + f''(x_0)h^2 \qquad (4.9)$$

Despejando $f''(x_0)$ de la ecuación (4.9) se tiene:

$$f''(x_0) = \frac{f(x_0) - 2f(x_0 + h) + f(x_0 + 2h)}{h^2} + Oh \qquad (4.10)$$

Reemplazando (4.10) en (4.7) se obtiene

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} - \frac{f(x_0) - 2f(x_0 + h) + f(x_0 + 2h)}{2h^2} h + Oh^2$$

$$f'(x_0) = \frac{2f(x_0 + h) - 2f(x_0) - f(x_0) + 2f(x_0 + h) - f(x_0 + 2h)}{2h} + Oh^2$$

$$f'(x_0) = \frac{-3f(x_0) + 4f(x_0 + h) - f(x_0 + 2h)}{2h} + Oh^2 \qquad (4.11)$$

La ecuación (4.11) es conocida como la ***formula de los tres puntos progresiva***. De manera similar es posible desarrollar las formulas de los tres puntos regresivas y centradas, así como las de los cinco puntos y derivadas de orden superior.

Las tablas a continuación resumen las formulas para aproximación de las derivadas

Primera Derivada		
Formula de diferencias finitas progresivas	Dos Puntos: $f'(x_0) = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h}$	Oh
	Tres Puntos: $f'(x_0) = \frac{-3f(x_0) + 4f(x_0 + h) - f(x_0 + 2h)}{2h}$	Oh^2
Formula de diferencias finitas centradas	$f'(x_0) = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0 - h)}{2h}$	Oh^2
	$f'(x_0) = \frac{f(x_0 - 2h) - 8f(x_0 - h) + 8f(x_0 + h) - f(x_0 + 2h)}{12h}$	Oh^4
Formula de diferencias finitas regresivas	$f'(x_0) = \frac{f(x_0) - f(x_0 - h)}{h}$	Oh
	$f'(x_0) = \frac{f(x_0 - 2h) - 4f(x_0 - h) + 3f(x_0)}{2h}$	Oh^2

Segunda Derivada	

Formula de diferencias finitas progresivas	$f''(x_0) = \dfrac{f(x_0) - 2f(x_0+h) + f(x_0+2h)}{h^2}$	Oh
	$f''(x_0) = \dfrac{2f(x_0) - 5f(x_0+h) + 4f(x_0+2h) - f(x_0+3h)}{h^2}$	Oh^2
Formula de diferencias finitas centradas	$f''(x_0) = \dfrac{f(x_0-h) - 2f(x_0) + f(x_0+h)}{h^2}$	Oh^2
	$f''(x_0) = \dfrac{-f(x_0-2h) + 16f(x_0-h) - 30f(x_0) + 16f(x_0+h) - f(x_0+2h)}{12h^2}$	Oh^4
Formula de diferencias finitas regresivas	$f''(x_0) = \dfrac{f(x_0-2h) - 2f(x_0-h) + f(x_0)}{h^2}$	Oh
	$f''(x_0) = \dfrac{-f(x_0-3h) + 4f(x_0-2h) - 5f(x_0-h) + 2f(x_0)}{h^2}$	Oh^2

Tercera Derivada		
Formula de diferencias finitas progresivas	$f'''(x_0) = \dfrac{-f(x_0) + 3f(x_0+h) - 3f(x_0+2h) + f(x_0+3h)}{h^3}$	Oh
	$f'''(x_0) = \dfrac{-5f(x_0) + 18f(x_0+h) - 24f(x_0+2h) + 14f(x_0+3h) - 3f(x_0+4h)}{2h^3}$	Oh^2
Formula de diferencias finitas centradas	$f'''(x_0) = \dfrac{-f(x_0-2h) + 2f(x_0-h) - 2f(x_0+h) + f(x_0+2h)}{8h^3}$	Oh^2
	$f'''(x_0) = \dfrac{f(x_0-3h) - 8f(x_0-2h) + 13f(x_0-h) - 13f(x_0+h) + 8f(x_0+2h) - f(x_0+3h)}{8h^3}$	Oh^4
Formula de diferencias finitas regresivas	$f'''(x_0) = \dfrac{-f(x_0-3h) + 3f(x_0-2h) - 3f(x_0-h) + f(x_0)}{h^3}$	Oh
	$f'''(x_0) = \dfrac{3f(x_0-4h) - 14f(x_0-3h) + 24f(x_0-2h) - 18f(x_0-h) + 5f(x_0)}{2h^3}$	Oh^2

Ejemplo 4.1

Aproximar la primera derivada de la función $f(x) = e^{2x}$ con todas las formulas que se encuentran en las tablas para un $x_0 = 1.1$ con un tamaño de paso $h = 0.1$. Use el hecho que $f'(1.1) = 18.050$ para determinar el error absoluto y relativo producido por cada formula.

Solución:

Usando las formulas de diferencias finitas progresivas (tabla 4.1), se requieren los valores de *$f(x_0)$, $f(x_0+h)$* y *$f(x_0+2h)$*

$f(x_0)$: $f(1.1) = 9.025$

$f(x_0+h)$: $f(1.2) = 11.023$

$f(x_0+2h)$: $f(1.3) = 13.464$

$$f'(1.1) = \frac{11.023 - 9.025}{0.1} = 19.980$$

$E_A = |18.050-19.980| = 1.930$

$E_R = 1.930 / 18.050 \times 100\% = 10.7\%$

$$f'(1.1) = \frac{-3\cdot(9.025) + 4\cdot(11.023) - 13.464}{2(0.1)} = 17.765$$

$E_A = |18.050-17.765| = 0.285$

$E_R = 0.285 / 18.050 \times 100\% = 1.58\%$

Usando las formulas de diferencias finitas centradas se requiere:

$f(x_0 - 2h)$: $f(0.9) = 6.050$

$f(x_0 - h)$: $f(1.0) = 7.389$

$f(x_0+h)$: $f(1.2) = 11.023$

$f(x_0+2h)$: $f(1.3) = 13.464$

$E_A = |18.050-18.170| = 0.120$

$E_R = 0.120 / 18.050 \times 100\% = 0.665\%$

$$f'(x_0) = \frac{11.023 - 7.389}{2(0.1)} = 18.170$$

$E_A = |18.050-18.048| = 0.002$

$E_R = 0.002 / 18.050 \times 100\% = 0.009\%$

$$f'(x_0) = \frac{6.050 - 8\cdot(7.389) + 8\cdot(11.023) - 13.464}{12(0.1)} = 18.048$$

Ahora usando las diferencias finitas regresivas, se requieren los siguientes valores

f(x_0 - 2*h*): *f*(0.9) = 6.050

f(x_0 - *h*) : *f*(1.0) = 7.389

f(x_0) : *f*(1.1) = 9.025

$$f'(x_0) = \frac{9.025 - 7.389}{0.1} = 16.360$$

E_A = |18.050-16.360| = 1.69

E_R = 1.69 / 18.050 x 100% = 9.363%

$$f'(x_0) = \frac{6.050 - 4(7.389) + 3(9.025)}{2(0.1)} = 17.845$$

E_A = |18.050-17.845| = 0.205

E_R = 0.002 / 18.050 x 100% = 1.136%

Del ejercicio anterior se puede concluir que las mejores aproximaciones las ofrecen las diferencias finitas centradas, por lo tanto estas se deben preferir siempre que se puedan utilizar.

DIFERENCIACIÓN NUMÉRICA CON MATLAB

Para el calculo de la derivada de una función a partir de valores tabulados de la función se realizo el siguiente archivo .m.

Este archivo .m encuentra la derivada para un conjunto de puntos igualmente espaciados en x. Estos puntos se deben introducir en forma de vectores. Un vector para x y un vector para y. El archivo .m genera otro vector d que es un vector que contiene la derivada de la función dada con x e y encontrado usando la formula de los dos puntos. Para los puntos extremos el programa utiliza los métodos de diferencia finita progresiva (para el primer punto) y regresiva (para el primer punto). Para los puntos centrales se utiliza el método de diferencia finita centrado

der2p.m

```
function d=der2p(x,y);
%d=der2p(x,y)
%archivo .m que sirve para determinar la derivada de una función dada
por
%medio de puntos igualmente espaciados en x con tamaño de paso h, por
medio
%de la formula de dos puntos.
%En los puntos extremos se utilizan las formulas de diferencias
finitas
%progresivas y regresivas y en los puntos medios se usa la formula de
%diferencias finitas centradas.
%las variables x y y son vectores de igual tamaño que incluyen los
valores
%de la función en x y en y.  Estos vectores deben ser de tamaño mayor
o
%igual que 3
%

if size(x)==size(y) %se observa que los dos vectores sean del mismo
tamaño
    [m,n]=size(x);
    h=x(2)-x(1); %tamaño del paso
    if n>=3  %se verifica que se den mas de dos puntos

        for i=2:n-1 %se trabajan con los puntos intermedios

            d(i)=(y(i+1)-y(i-1))/(2*h);
        end
        d(1)=(y(2)-y(1))/h;
        d(n)=(y(n)-y(n-1))/h;
    else
        d='se deben dar mas de dos puntos'
    end
else
    d='los vectores x y y deben ser del mismo tamaño'
end
```

Encontremos la derivada de la función $f(x) = e^{2x}$ desde x = 0.8 hasta x = 1.3 con un tamaño de paso h = 0.1, usando este archivo .m

COMMAND WINDOW	EXPLICACION
>> x=0.8:0.1:1.3;	Se crea un vector con elementos linealmente espaciados que comienzan en 0.8 y termine en 1.3 con un tamaño de paso h = 0.1. El punto y coma es para que no se visualice el vector x. El vector x es de 6 elementos. Si quiere verlo escriba x y oprima enter
>> y=exp(2*x);	Se evalúa la función $f(x) = e^{2x}$, usando para ello el vector x. Se recibe un vector de igual tamaño que el vector x donde cada elemento de y es la evaluación de la función usando cada elemento del vector x
>> d=der2p(x,y)	Se utiliza el archivo der2p.m para determinar la derivada en cada uno de los puntos dados. Se crea el vector d que se muestra a continuación.
d = 10.9662 12.1801 14.8768 18.1706 22.1936 24.4056	

Se obtiene entonces la siguiente tabla de datos:

x	*y*	*f'(x)*
0.8	4.953	10.966
0.9	6.0496	12.18
1	7.3891	14.877
1.1	9.025	18.171
1.2	11.023	22.194
1.3	13.464	24.406